

RAPPORT D'ACTIVITE DU CECIC (2003)

.Le CECIC regroupe les laboratoires de l'institut de chimie moléculaire de Grenoble (ICMG) et le laboratoire de Cristallographie du CNRS.

Actuellement il est équipé **d'un IBM-SP500 composé de 3 nœuds quadri-processeurs POWER3 de 8Go de mémoire et 2 fois 18Go de disques chacun**
d'un SGI Origin200 quadri-processeur de 4Go et de 2 disques de 18Go

d'un SGI Origin300 quadri-processeur de 4Go et de 2 disques de 18Go

Projets Scientifiques Concernés.

Les potentialités scientifiques des unités de recherches partenaires de ce projet leur permettent de s'inscrire totalement dans la dynamique de développement du Centre d'Expérimentation pour le Calcul Intensif en Chimie. Au travers des réalisations récentes et surtout des projets scientifiques des chercheurs de ces unités, apparaissent des besoins d'extension de matériels informatiques et de logiciels, qui permettront à cette communauté de conserver une position scientifique de pointe dans plusieurs domaines scientifiques.

Préambule

Cette année a été marquée dans le domaine de la chimie grenobloise par la création de l'Institut de Chimie Moléculaire Grenoblois qui, en ce qui concerne le CECIC, regroupe ses principaux acteurs (CERMAV, DPM, LEDSS, LEOPR), ce qui s'est traduit par de fortes collaborations intra-partenaires (en particulier DPM-CERMAV et LEOPR-LEDSS). En ce qui concerne le Laboratoire de Cristallographie le contexte lié au changement de direction prévu pour 2004 n'a pas favorisé l'utilisation du CECIC par ce laboratoire.

Ceci explique pourquoi dans ce rapport n'apparaîtront que l'activité du LEDSS et du CERMAV.

I- LEDSS

Bien que l'année 2003 ait vu l'arrivée au CECIC de nouveaux utilisateurs de l'équipe de chimie théorique du LEDSS (A Fouqueau pour la quantique et H. Jamet pour la modélisation moléculaire), l'équipe de chimie théorique du LEDSS, reste encore principalement impliquée au CECIC à travers les travaux de A. Milet qui concernent les méthodes quantiques.

Méthodes quantiques

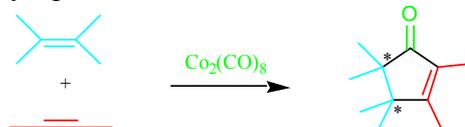
Réactivité

La réactivité représente un axe de recherches développées de manière importante sur le site de Grenoble, en particulier au LEDSS. La détermination des intermédiaires et états de transition nécessaires à la caractérisation des chemins réactionnels, requiert l'utilisation de l'ensemble des méthodes de la chimie quantique. Les méthodes post-Hartree telles que le niveau de calcul CCSD(T) permettent d'obtenir des résultats très fiables pour des systèmes à couches fermées, mais malheureusement de petite taille. Pour des systèmes plus importants, les méthodes de type fonctionnelle de la densité (DFT) permettent d'inclure, à moindre coût, la corrélation électronique dans les optimisations de géométrie. Cette approche est particulièrement intéressante pour les systèmes organométalliques qui comportent des états proches en énergie et, souvent un nombre important d'électrons. De plus, les études les plus récentes que nous avons menées utilisent les méthodes mixtes : méthodes qui décrivent le cœur de la molécule à un niveau de corrélation plus

élevée que le reste de la molécule souvent décrit par des méthodes de modélisation moléculaire. Ce type d'études a été mené sur des systèmes organométalliques et a donné lieu à publication.

Réactivité organométallique :

La réaction de Pauson-Khand suscite, depuis sa découverte en 1973, un vif intérêt puisqu'elle permet la synthèse régiosélective de penténonnes en une seule étape. De plus cette réaction existe en version stœchiométrique mais aussi catalytique, et en version inter et intramoléculaire.



Si la stratégie de synthèse s'est effectivement beaucoup développée ces trente dernières années avec la mise au point de promoteurs, l'utilisation d'alcènes et d'alcynes toujours plus nombreux, l'utilisation de phosphines parfois chirales pour améliorer l'excès énantiomérique, ..., le mécanisme même de la réaction de Pauson-Khand est toujours sujet à discussion et les interrogations sur le mécanisme et les étapes-clés nombreuses.

L'étude de cette réaction nous a donc permis de battre en brèche certaines idées reçues sur le site de réactivité de l'alcène ou le rôle exact des promoteurs, ce qui a donné lieu à 4 publications dont 2 au JACS. Pour l'étude de la réactivité des oléfines, nous avons décidé de mener en parallèle une étude purement quantique et une étude par la méthode mixte ONIOM de la réactivité. En dehors des conclusions d'intérêt chimique concernant la rationalisation de la réactivité des oléfines pour la réaction de Pauson-Khand, la comparaison des méthodes mixtes et quantiques pour des systèmes comportant deux métaux de transition et incorporant des calculs d'état de transition a été très instructive d'un point de vue méthodologique et montre le potentiel des méthodes mixtes. Ces résultats viennent d'être acceptés pour publication.

Il est important de noter le rôle joué par le CECIC dans cette étude. En effet, nous avons pu mener en parallèle des calculs par des méthodes mixtes et par des méthodes DFT sur strictement les mêmes systèmes et ceci même pour les états de transition. Etant donnée la taille des systèmes étudiés, cela nous a demandés des temps de calcul important que nous n'aurions pas pu mener sans la structure du CECIC qui allie souplesse et puissance de calculs.

Pour l'étude du mécanisme par les méthodes mixtes, le rôle du CECIC ne se limite pas au seul aspect « computational » puisque la structure du CECIC a permis le **rapprochement des communautés chimiques** du LEDSS (chimie quantique) et du CERMAV (modélisation moléculaire) et a fortement stimulé le développement ce thème.

Réactivité non radicalaire et caractérisation spectroscopique : L'étude des mécanismes de cyclo-addition (4 + 2; 3 + 2; 2 + 2; 3 + 3) constitue un domaine d'études particulièrement important qui est développé en partenariat avec des expérimentateurs. Les réactions modèles telles que l'addition du butadiène sur l'éthylène, le formaldéhyde et le thioformamide illustrent les travaux réalisés dans le cas des cycloadditions de type 4 + 2. Les autres types de cyclo-additions sont traités dans le cadre d'addition de nitroène, thème en fort développement dans notre laboratoire.

De plus, nous avons pu contribuer à la caractérisation de systèmes d'intérêt biologiques permettant la reconnaissance de défauts dans l'ADN. De tels sujets contribuent directement à la mise au point de puces à ADN dans le cadre d'une collaboration industrielle avec le laboratoire Bio-Mérieux. Nous avons ainsi pu simuler par des méthodes quantiques le spectre RMN d'une molécule « reporter » capable de rendre compte de la présence ou non d'un défaut de l'ADN. Cette molécule possédait plus d'une soixantaine d'atomes et son spectre RMN a pu être simulé ce qui a permis de confirmer sa conformation. Le CECIC a permis de pouvoir réagir rapidement pour un problème certes ponctuel mais d'intérêt très concret, ce qui montre la puissance prédictive de telles méthodes et son intérêt pour des systèmes d'intérêt biologiques.

Réactivité radicalaire : Les additions de radicaux libres sur les molécules non saturées représentent un moyen commode de créer de nouvelles liaisons. Ils jouent un rôle essentiel dans de très nombreux processus de polymérisation et interviennent dans de nombreux processus biologiques. Des études systématiques ont été entreprises, qui incluent les effets de solvants, sur l'aptitude des méthodes de la fonctionnelle de la densité, à traiter les problèmes de réactivité et de régio-sélectivité radicalaires. L'objectif de ce travail est double : (i) mieux appréhender les facteurs qui gouvernent la réactivité et l'orientation de ces réactions; (ii) élaborer un protocole fiable qui permette de traiter des ensembles atomiques importants, susceptibles de mimer ceux rencontrés dans des systèmes d'intérêt biologiques. Les réactions étudiées concernent l'addition du radical méthyle sur des éthènes diversement substitués et l'influence du di-oxygène sur les réactions d'arrachement d'hydrogène par des radicaux de type oxyl-imides. De tels systèmes sont particulièrement délicats à traiter à cause des problèmes liés aux divers états de spin susceptibles d'intervenir en particulier à cause de la présence du di-oxygène (état fondamental triplet).

Interactions

La description des interactions inter-moléculaires peut être menée par deux méthodes qui sont souvent utilisées de façon complémentaire: l'approche supermoléculaire et la théorie des perturbations. L'approche supermoléculaire consiste simplement à calculer l'énergie d'interaction entre deux molécules, en soustrayant à l'énergie de la supermolécule, la somme des énergies des monomères qui la constituent. Une alternative à cette approche consiste à calculer directement l'énergie d'interaction en utilisant la Théorie de Perturbation avec Adaptation de Symétrie (SAPT), qui permet la décomposition de l'énergie d'interaction en termes physiquement interprétables par la physique classique (termes électrostatiques ou d'induction) ou par la physique quantique (termes d'échanges ou de dispersion). Cette méthode a aussi été développée pour les interactions à trois corps, c'est à dire à trois molécules. Parmi les nombreux domaines d'applications, ceux développés à Grenoble concernent la *spectroscopie* (trimère HCl(H₂O) transitions spectroscopiques correspondant à un effet tunnel entre deux minima, énoncé des règles de sélection, schéma d'intensité des raies observables en spectroscopie de rotation), *astrophysique* (interaction entre l'ammoniac NH₃ et l'hélium, reproduction théorique de spectres haute résolution), *chimie 'environnementale'* (agrégats HCl(H₂O) : adsorption et réaction de HCL au niveau des calottes glaciaires sont responsables de la formation de Cl₂, qui dans la stratosphère, forment les radicaux Cl* responsable de la destruction de la couche d'ozone). Il est intéressant à noter qu'une partie de ces travaux sur HCl(H₂O)_n, essentiellement réalisés au CECIC, ont été abondamment cités dans la littérature et en particulier dans le journal **Science**.

De plus, en collaboration avec le laboratoire de chimie théorique de Strasbourg, nous avons mené une étude sur la description des interactions des agrégats de type OH⁻(H₂O)_n. Cette étude avait pour but de mieux cerner les limites de la description de ce type d'interactions dont le rôle est fondamental dans la description des effets de solvant. Cette dernière étude a donné lieu à 5 publications ces deux dernières années. Une partie de ces travaux ont certes été réalisés au CECIC mais une partie non négligeable l'a été sur le centre national de calcul du CNRS l'IDRIS.

Vers une meilleure description de la corrélation électronique

Parallèlement au traitement de molécules toujours plus importantes, une puissance toujours accrue des ordinateurs permettrait d'étudier les problèmes chimiques à un niveau de calcul plus fiable, i.e. en améliorant la description de la corrélation électronique. Si les chimistes quanticiens se sont toujours intéressés à la description des molécules (énergie, géométrie, répartition de charges, orbitales moléculaires, propriétés électroniques (moment dipolaire, polarisabilité, ...)) ils n'oublient pas que l'essence de la chimie a pour origine, et finalité, l'interaction entre molécules. L'interaction entre deux molécules est un préliminaire à toute réaction chimique. L'interaction d'une molécule

avec le solvant peut influencer de manière prépondérante sur sa réactivité. Les interactions inter ou intra moléculaires vont conduire à certaines conformations du complexe moléculaire, qui peuvent, à leur tour, déterminer la réactivité de ce dernier, comme c'est souvent le cas pour des molécules biologiques. Ces conformations, sont responsables de la structure des spectres haute résolution.

La description des interactions, quelle que soit la méthode utilisée reste un domaine délicat d'un point de vue théorique et très exigeant quant aux moyens informatiques requis pour une étude *ad hoc*.

II- CERMAV

Deux équipes de recherche du CERMAV sont plus directement impliquées dans les travaux menés au CECIC, l'équipe de « *Glycobiologie Moléculaire* » dirigée par Anne Imberty et l'équipe de « *Structure et Fonction des Polysaccharides* » dirigée par Karim Mazeau et utilisent indifféremment les méthodes de mécanique quantique et de modélisations moléculaire.

Mécanique et Dynamique Moléculaires.

Etudes bio-informatiques et structurales de glycosyltransférases

Trois études sont en cours dans ce domaine :

1/ Identification de séquences de glycosyltransférases dans les génomes qui sont accessibles sur Internet. Recherche des deux repliements protéiques qui ont été déterminés à ce jour pour les glycosyltransférases : le type BGT et le type SpsA par des méthodes de reconnaissance de repliement protéiques. Toutes les protéines traduites d'un génome sont testées ce qui engendre des calculs importants.

2/ Etudes par dynamique moléculaire dans l'eau de l'interaction d'une glycosyltransférase avec un de ses substrats : le nucléotide-sucre. Des trajectoires longues (plusieurs ns) sont nécessaires car on essaie de reproduire le mouvement de grande ampleur (plusieurs Å) d'une bouche qui vient fermer le site actif.

3/ Etude du mécanisme de la réaction enzymatique par calculs *ab-initio* (en collaboration avec le LEDSS). Application des méthodes mixtes : « *Mécanique Quantique-Mécanique Moléculaire* » à l'explication du mécanisme catalytique mis en jeu par des glycosyltransférases lors de la glycosylation.

Modélisation moléculaire de la cellulose et de ses interactions.

L'ensemble des calculs réalisés en 2003 sur les ordinateurs du CECIC a pour objectif de caractériser certaines organisations ultrastructurales de la cellulose et des interactions qui ont lieu à l'interface solide/liquide ou solide/gaz. Les différents thèmes abordés sont les suivants :

1/ Dynamique moléculaire de l'allomorphe cristallin I β . Les coordonnées, issues de l'expérience, des atomes constituant cette phase cristalline étant rendus disponibles pour la communauté scientifique, nous avons étudié en dynamique moléculaire 16 modèles de minicristaux qui diffèrent par l'orientation des hydroxyles (1ns/modèle). Nous espérons ainsi révéler la dynamique du réseau de liaison Hydrogène qui stabilise cette structure cristalline.

2/ Adsorption de molécules aromatiques sur la surface de fibres de cellulose. C'est le thème le plus développé, dans le sens où, au total, nous avons étudié, toujours en dynamique moléculaire, l'adsorption de 80 molécules sur la cellulose. Nous avons étudié en particulier des molécules

odorantes, pour des applications textiles à relargage différé. Des relations structure-propriété ont été établies lors d'une étude conjointe avec des expérimentateurs. Ceci a permis d'accéder à une compréhension à l'échelle atomique des facteurs qui influencent le phénomène d'adsorption. Finalement, nous avons abordé un problème biologique complexe d'importance : la structuration de la paroi végétale secondaire à travers la modélisation de l'adsorption de molécules modèles des lignines sur la surface des fibres de cellulose.

3/ Interaction cellulose hémicelluloses : modèles des assemblages pariétaux (de la paroi végétale primaire). Ces calculs, en cours, modélisent le dépôt des xyloglucannes (oligomères et polymères) sur la cellulose. L'objectif est ici de révéler les déterminants structuraux des xyloglucannes responsables de leur adsorption.

4/ Interface dans les composites renforcés par des nanocristaux de cellulose. Cet axe de recherche est particulièrement coûteux en temps machine. L'idée est de générer et d'étudier en dynamique moléculaire un système qui présente une interface entre deux systèmes solides : le premier est organisé, il représente des macrocristaux de cellulose et l'autre est amorphe, il représente la matrice polymère. Nous avons fait varier la structure chimique de la matrice de synthèse et avons pu corréler les tests mécaniques expérimentaux au travail d'adhésion du polymère sur la cellulose évalué en modélisation.

MODELISATION MOLECULAIRE DANS L'EAU D'UN POLYSACCHARIDE DU VIN.

Cette étude concerne l'étude conformationnelle d'un méga-oligosaccharide du vin, le RG-II par dynamique moléculaire.

Dans un premier temps nous avons eu besoin de construire la molécule (32 monosaccharides, 18 types différents). Les géométries de chaque monosaccharide ont été obtenues à partir de données cristallographiques et de données provenant de la base des monosaccharides du CERMAV (<http://infopc2.cermav.cnrs.fr/cgi-bin/monos/monos.cgi>). Cependant, les charges partielles doivent être calculées par approximation de l'ESP (Electrostatic Partial Charges) en utilisant les données du champ électrostatique de Gaussian98. Au lieu de calculer les charges partielles de la molécule entière, celles-ci ont été calculées pour chaque type de résidu composant le RG-II. Ainsi, nous avons obtenu une base de données de 32 monomères (résidus terminaux et résidus présentant des liaisons) qui peuvent être employés pour construire d'autres oligosaccharides.

Une fois la molécule construite ainsi que les fichiers de coordonnées et la topologie obtenus, l'étape suivante est la simulation de la dynamique moléculaire. Dans un premier temps, le solvant a été pris en compte de manière implicite et la simulation a été effectuée en utilisant la méthode Generalized Born. La simulation d'une nanoseconde de RG-II (plus de 600 atomes) à 300 °K ($5 \cdot 10^5$ pas avec un pas d'intégration de 2 fs, en utilisant SHAKE pour toutes les liaisons) a duré environ 24 h. Dans un deuxième temps, nous avons effectué une simulation de cette molécule dans l'eau en utilisant le solvant de manière explicite. Le RG-II était inclus dans une boîte de 60 Å de côté en présence d'environ 9000 molécules de l'eau et une dynamique moléculaire plus complexe a été effectuée : les molécules d'eau sont d'abord minimisées sans déplacement du soluté puis *une dynamique courte est appliquée dans les mêmes conditions pour leur relaxation*. Une deuxième minimisation est effectuée, relaxant progressivement les contraintes appliquées au soluté. Pour terminer, la simulation du système entier est effectuée, avec un premier chauffage de 50 picosecondes (de 10 à 300 K) puis avec l'étape de production comportant plusieurs travaux de 200 picosecondes à 300 K. Cette simulation a pris plus de sept jours, dont plus de 95% ont été utilisés dans le calcul interactions non-liées.

L'utilisation du traitement parallèle devrait réduire ce temps de façon considérable. Notre but est d'effectuer une simulation (dans le vide aussi bien qu'en employant un solvant explicite) d'un dimère de RG-II, une fois que les contraintes expérimentales auront été obtenues à partir des données RMN.

Mécanique Quantique

CALCUL AB INITIO DE CHARGES PARTIELLES DE MONO ET OLIGOSACCHARIDES

Dans le cadre de la modélisation d'une molécule complexe comme l'ancre GPI de la glycoprotéine de Tamm-Horsfall (THp), le calcul de charges partielles est une étape nécessaire avant de pouvoir réaliser de la dynamique moléculaire.

Des calculs ab initio ont été effectués dans le but de :

- ➔ calculer les charges partielles atomiques
- ➔ d'étudier l'influence de la conformation de ces molécules sur la valeur de la charge calculée
- ➔ de comparer les charges obtenues en utilisant différentes fonctions telles que Hartree-Fock ou B3LYP
- ➔ de comparer les charges obtenues en utilisant différentes bases (4-31 G, 6-31 G..)

Les molécules étudiées sont des mono et oligosaccharides. Le nombre d'atomes des molécules étudiées varie entre 51 et 78. L'influence de la conformation des molécules sur le calcul des charges a été étudiée par construction de différents conformères et calcul des charges partielles atomiques de chaque conformère.

Publications

Les différentes composantes du CECIC estiment qu'environ 50 permanents et une vingtaine de doctorants et post-doctorants sont directement ou indirectement utilisateurs de nos matériels. Cette utilisation contribue environ à une cinquantaine de publication chaque année.

CERMAV

A. de la Rosa, L. Heux, J.Y. Cavailé. K. Mazeau.

Molecular modeling of the mobility of poly (allyl-alcohol), PAA and poly (vinyl alcohol), PVA
Polymer; (2002), 43, 5665-5677.

M. Wimmerová, S.B. Engelsen, E. Bettler, C. Breton & A. Imberty.

Combining fold recognition and exploratory data analysis for searching for glycosyltransferases in the genome of *Mycobacterium tuberculosis*.
Biochimie 85, 2003, 691-700.

S. Besombes, D. Robert, F.R. Taravel, J.P. Utille and K. Mazeau.

-O-4 lignin model compounds. 1. Comparative study of predicted and experimental
-O-4 dimer conformational characteristics for a guaiacyl
Holzforschung; (2003), 57, 266-274.

S. Besombes, D. Robert, F.R. Taravel, J.P. Utille and K. Mazeau.

-O-4 dimers. Molecular modeling of syringyl and parahydroxyphenyl Comparative study of predicted and experimental conformational characteristics of lignin model compounds

J. of Agricultural and Food Chemistry; (2003), 51, 34-42.

K. Mazeau and L. Heux.

Molecular Dynamics simulations of the bulk native crystalline and amorphous structures of cellulose
J. Phys. Chem. B. (2003), 107, 2394-2403.

C. Vanhaverbeke, A. Heyraud and K. Mazeau

Conformational analysis of the exopolysaccharide from *Burkholderia caribensis* strain MWAP71.
Impact on the interaction with soils.
Biopolymers. (2003), 69, 480-497

M. Rodriguez-Carvajal, C. Hervé du Penhoat, K. Mazeau, T. Doco and S. Pérez.

The three-dimensional structure of the mega-oligosaccharide rhamnogalacturonan II monomer: a
combined
molecular modelling and NMR investigation.
Carb Res. (2003), 338, 651-671

O. Guetta, K. Mazeau, R. Auzély, M. Milas and M. Rinaudo.

Structure and properties of a bacterial polysaccharide named Fucogel[®].
Biomacromolecules. (2003), (5), 1362-1371.

M. Jambon, A. Imberty, G. Deleage & C. Geourjon

A new bioinformatic approach to detect common 3D sites in protein structures
Proteins, 52, 2003, 137-145

Z. Krie, J. Koca, A. Imberty, A. Charlot & R. Auzely-Velty

Investigation of the complexation of (+)-catechin by beta-cyclodextrin by combination of NMR,
microcalorimetry and molecular modeling techniques
Org. Biomol. Chem. 1, 2003, 2590-2595

L. Šnajdrová, P. Kulhánek, A. Imberty & J. Koèa

Molecular dynamics simulations of glycosyltransferase LgtC.
Carbohydr. Res. (sous presse)

S. Pérez, M.A. Rodriguez-Carvajal & T. Doco

A complex plant cell wall polysaccharide: rhamnogalacturonan II. A structure in quest of a function
Biochimie, (2003) 85, 109-121

G. Cioci, A. Rivet, J. Koca, S. Pérez.

Conformational analysis of complex oligosaccharides : the CICADA approach to the Uromodulin *O*-
Glycans (sous presse) *Carbohydr. Res.*

Communications à l'occasion de congrès scientifiques

M. Wimmerova, E. Bettler & A. Imberty

Glycosyltransferase fold recognition analysis of the *Mycobacterium tuberculosis* genome sequence.
M., GlycoT2002 - Third International Symposium on Glycosyltransferases, Stockholm, Sweden, 19-22
sept 2002

L. Snajdrova, J. Koca & A. Imberty,

Molecular dynamics simulations on glycosyltransferases LgtC,
Eurocarb 12, Grenoble, 6-11 juil 2003

F. Chevalier, J. Lopez-prados, M. Martin-lomas, P. Nieto, S. Pérez

Conformational study of GPI backbone by NMR and modeling

Eurocarb 12, Grenoble, 6-11 juil 2003.

M.A. Rodriguez-Carvajal, C. Hervé du penhoat, K. Mazeau, S. Pérez

The three-dimensional structure of RG-II : An extremely complex mega-oligosaccharide essential for plants

Eurocarb 12, Grenoble, 6-11 juil 2003.

H. Heissigerova, C. Breton, A. Imberty, J. Moravcov, A. Rivet

Molecular modelling of glycosyltransferases involved in the biosynthesis of blood group A and B, Forssman and iGb3 antigens

Eurocarb 12, Grenoble, 6-11 juil 2003.

G. Cioci, J. Koca, S. Pérez, A. Rivet

Towards the exploration of higher dimensional potential energy surfaces.

Eurocarb 12, Grenoble, 6-11 juil 2003.

LEDSS

NAIMA TURKI, ANNE MILET, OURIDA OUAMERALI, ROBERT MOSZYNSKI, AND ELISE KOCHANSKI,

« the OH⁻(H₂O)₂ system : efficiency of ab initio and dft calculations for two-and three- body interactions »,

Journal of Molecular Structure-Theochem **2002**, 577, 239-253.

CEZARY STRUNIEWICZ, ANNE MILET, JOANNA SADLEJ, AND ROBERT MOSZYNSKI

« Theoretical study of the hydrogen chlorine trihydrate ».

International Journal of Quantum Chemistry, **2002**, 90, 1151-1162.

GAÉTAN WECK, ANNE MILET, ROBERT MOSZYNSKI, ELISE KOCHANSKI

« Some Problems with the accuracy in ab initio calculations of the static dipole polarizabilities components : example of the OH⁻ ion. »

Journal of Molecular Structure-Theochem, **2002**, 591 141-150.

ROGER ARNAUD, ANNE MILET, CARLO ADAMO, CATHY EINHORN AND JACQUES EINHORN

``Hydrogen abstraction from ethylbenzene by imide-N-oxyl radicals with or without O₂: a DFT theoretical study ''

J. Chem. Soc., Perkin Trans 2 **2002** 1967-1972.

FLORENT RACHET, MICHEL CHRYSOS, G. LOTHON, ROBERT MOSZYNSKI, AND ANNE MILET

``Collision induced light scattering by gaseous neon ''

AIP Conf. Proc. **2002**, 645,174.

GAÉTAN WECK, ANNE MILET, ROBERT MOSZYNSKI AND ELISE KOCHANSKI

“ Role of cancellation of errors in ab initio calculations : structure and energetics of the OH(H₂O) system and electric dipole properties of the subsystems ”

J. Phys. Chem. A, **2002**, 106 12084--12094.

FLORENT RACHET, MICHEL CHRYSOS, G. LOTHON, ROBERT MOSZYNSKI, ANNE MILET

“Extended wavenumber domain collision-induced Raman scattering by gaseous neon “

J. Raman Spectrosc. **2003**, 34: 000-000.

YVES GIMBERT, DENIS LESAGE, ANNE MILET, FRANÇOISE FOURNIER , ANDREW E. GREENE, JEAN-CLAUDE TABET

“On the early events in the Pauson-Khand reaction”

Org. Lett. **2003**, 22, 4073-4075.

GAÉTAN WECK, ANNE MILET, ROBERT MOSZYNSKI, ELISE KOCHANSKI

“Analysis of accuracy in ab initio calculations of the static dipole polarizability components.”

JCMSE à paraître.

THEODORUS DE BRUIN, ANNE MILET, ANDREW E. GREENE, YVES GIMBERT

“Insight into the Reactivity of Olefins in the Pauson-Khand Reaction”

J. Org. Chem. , **2003**, à paraître

Liste des équipes utilisatrices des équipements

Identification de l'équipe (Type, Numéro, Intitulé)	Nom et prénom du responsable	DS
UMR 5616 - Laboratoire d'Etudes Dynamiques et Structurales de la Sélectivité (LEDSS)	Pr. P.DUMY	4
Equipe Chimie Biomimétique	Pr. J.L. PIERRE	4
Equipe Synthèse et Réactivités de Composés Azotés	Pr. Y. VALLEE	
Equipe Synthèse de Produits Naturels	DR. A. GREENE	4
Equipe Ingénierie Moléculaire & Chimie Bioorganique	Pr. P. DUMY	
Equipe Matériaux Biomédicaux	Dr. C. MORIN	
Equipe Chimie Théorique	Pr. M. CASIDA	
UMR 5630 – Laboratoire d'Electrochimie et de Photochimie Redox (LEOPR)	Dr. JC. MOUTET	4
Equipe Electrochimie et Photochimie Coordination	Dr. A. DERONZIER	4
Equipe Reconnaissance et Activation Electrochimique	Dr. J. C. MOUTET	4
Equipe Bioélectrochimie	Dr. S. COSNIER	
Equipe Physico-Chimie des Interfaces	Pr. P. LABBE	4
UPR 5301 – Centre de Recherche sur les Macromolécules Végétales (CERMAV)	Dr. Serge PEREZ	4
Equipe et propriétés des Glycomatériaux	Pr Alain DUFRESNE	4
Equipe Chimie et physicochimie des polysaccharides	Pr. Marguerite RINAUDO	4
Equipe Structure Interaction et Dynamique Biomolécules	Dr. C. HERVE DU PENHOAT	4
Equipe Glycochimie et Biotechnologie Oligosaccharides	Dr. H. DRIGUEZ	4
Equipe Glycobiologie Moléculaire	Dr. A. IMBERTY	4
Equipe Biochimie des parois végétales	Pr. Jean-Paul JOSELEAU	5
UPR 5031 – Laboratoire de Cristallographie	Dr. G. TOURILLON	2
Equipe Diffraction X et microstructures	Dr. P. BORDET	2
Equipe Intermétalliques et Interstitiels	Dr. D. FRUCHART	2
Equipe Spectroscopie X et diffractions résonnantes	Dr J.L. HODEAU	2
UMR 5063 Département Pharmacochimie Moléculaire	Pr. J.L. DECOUT	4

L'ensemble de ces laboratoires recouvre une population des plus de 400 chimistes, physico-chimiques, pharmaciens, biochimistes,... Au travers des actions de recherche et des projets des différentes équipes des laboratoires partenaires, peuvent être énoncés les principaux domaines de recherches et d'applications qui suivent : **la chimie fine**, (synthèse des produits naturels, catalyseurs, complexes récepteurs-substrats, extractants de radio-éléments, anti-cancéreux, anti-rejets, nutriments,..) **les macro-molécules biologiques** (protéines, oligo- et polysaccharides, oligonucléotides,...) et leurs conjugués, **les matériaux**... Les substrats étudiés au sein des différents programmes de recherche sont de nature multiple. Ils se caractérisent par une distribution de masse moléculaire couvrant plusieurs ordres de grandeurs (de quelques dizaines d'atomes, à plusieurs centaines, voire plusieurs milliers). Ces substrats peuvent se présenter soit sous forme gazeuse, liquide, gel, colloïdale, solide cristallin, solide amorphe,...